

2次元フォトリック結晶共振器のFDTD解析

著者	佐藤 弘康, 渡辺 貴之, 澤谷 邦男, 川上 彰次郎
雑誌名	SENAC : 東北大学大型計算機センター広報
巻	43
号	2
ページ	35-44
発行年	2010-04
URL	http://hdl.handle.net/10097/00124568

[共同研究成果]

2次元フォトリック結晶共振器のFDTD解析

佐藤弘康 渡辺貴之 澤谷邦男 川上彰二郎*

東北大学大学院工学研究科, *株式会社フォトリックラティス

1. はじめに

FDTD法 (Finite-Difference Time-Domain Method)[1] は, 任意形状の誘電体を含む電磁界解析が容易な数値解析法として広く使われている. 近年はフォトリック結晶, メタマテリアルなどの人工結晶の電磁界解析設計にも用いられてきており, 周期構造がもつ多数のパラメータと分散特性との関係の解明, 所望の分散特性を得るための構造の最適化, 数値解析による現象の発見等に利用されている.

フォトリック結晶とは, 誘電率の大きく異なる2種類以上の誘電体を光の波長程度の格子定数を持つように周期的に配列した人工的な複合誘電体結晶である. この結晶中において光が複雑に多重散乱を起こすため, 分散性, 異方性などの光学特性や, フォトリックバンドギャップ(Photonic Band Gap, PBG)などのさまざまな特性が現れる[2]. これらの特性を持つ完全周期構造の一部に欠陥を与えて共振器や導波路を構成すれば, 理論上は Q 値が無限大の共振器や無損失の光伝送が可能であるが, 実際には周期構造は有限であるので, この場合の共振器や伝送路の Q 値や損失を数値的に明らかにする必要がある.

これまでのフォトリック結晶による共振器や導波路は, 完全バンドギャップの閉じ込め効果を利用したもの[3]-[5]であり, 完全バンドギャップが必要であるとされてきた. しかし, 完全バンドギャップが存在しなくても, 波長サイズの空間に無損失で電磁エネルギーが局在する波動が存在すること, つまり Q 値が無限大となる共振器や, 無損失伝送が可能な導波路が実現できることが川上により示された[6]. そこで本研究では, FDTD法を用いた完全周期構造の解析, および有限周期の結晶共振器の解析手法について述べるとともに, 完全バンドギャップの有無にこだわらず, 新たな構造のフォトリック結晶共振器の数値解析を行うことを目的とする[7-9].

2. 完全周期構造のFDTD解析

図1に示すフォトリック結晶は, 3種類の方角誘電体が格子定数 a の周期構造となっている方角誘電体結晶である. この方角誘電体結晶は, 完全周期構造において完全バンドギャップをもたないが, 共振器構造では Q 値が無限大となり, 導波路構造では無損失に伝搬する導波モードが存在するという, これまでの常識に対して反例となる現象をもつこと

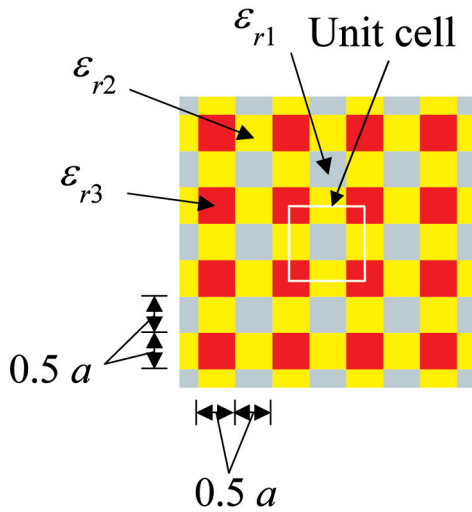


図1 方形誘電体結晶

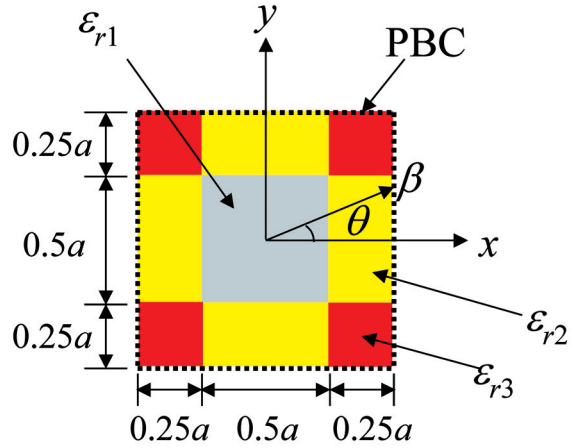


図2 完全周期構造の FDTD 解析モデル

が厳密に示されている[6]. 図1に示す方形誘電体結晶の完全周期構造を解析するため, 周期境界条件(Periodic Boundary Condition, PBC) を FDTD 解析に適用する. 周期境界条件は, 格子定数 a で表される単位セル中の電磁界と, 単位セルの外側の電磁界を関係づける Froquet の定理 (または Bloch の定理) に基づいている. 完全周期構造において電磁波が θ_0 方向に位相定数 β で伝搬する場合, 電磁界の PBC として

$$E(x+ma, y+na, \omega) = E(x, y, \omega) \times e^{-j\Psi_{x0}} \times e^{-j\Psi_{y0}} \quad (1)$$

$$\Psi_{x0} = \beta a \cos \theta_0, \quad \Psi_{y0} = \beta a \sin \theta_0 \quad (2)$$

が成り立つ. ここで, m, n は整数である. この PBC を FDTD 法に適用する. 本稿では,

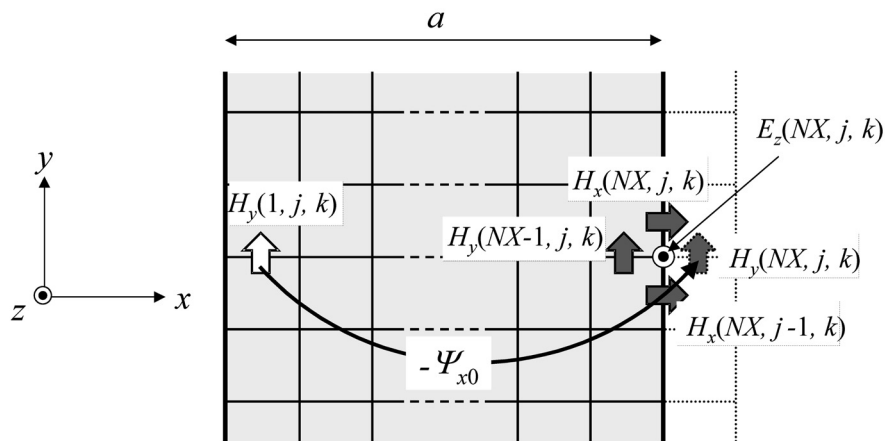


図3 周期境界条件を用いた FDTD 解析法

進行方向に対して電界が垂直である TE モード (E_z, H_x, H_y) について解析する. FDTD 法の解析モデルを図 2 に示す. 解析領域の内部は通常の FDTD 計算を行い, 単位セルの境界上の電界を計算するときに PBC を用いる. 例えば, $i=NX$ における z 方向の電界 $E_z(NX, j, k)$ を計算する際, x 方向の磁界 $H_x(NX, j, k)$, $H_x(NX, j-1, k)$ と y 方向の磁界 $H_y(NX, j, k)$, $H_y(NX-1, j, k)$ が必要である. ここで, PBC を用いると, 解析領域の外にある $H_y(NX, j, k)$ は $H_y(1, j, k)$ の位相を Ψ_{x0} 遅らせた値に等しく,

$$H_y(NX, j, k) = H_y(1, j, k)e^{-j\Psi_{x0}} \quad (3)$$

が得られる. したがって, 周期境界上の電界 $E_z(NX, j, k)$ は

$$\begin{aligned} E_z^{n+1}(NX, j, k) = & E_z^n(NX, j, k) \\ & + \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta x} \left(H_y^{n+\frac{1}{2}}(1, j, k)e^{-j\Psi_{x0}} - H_y^{n+\frac{1}{2}}(NX-1, j, k) \right) \\ & - \frac{\Delta t}{\varepsilon \Delta y} \left(H_x^{n+\frac{1}{2}}(NX, j, k) - H_x^{n+\frac{1}{2}}(NX, j-1, k) \right) \end{aligned} \quad (4)$$

と表すことができ, 同様にして他の周期境界上の電界成分を求めることができる.

比誘電率 $\varepsilon_{r1}, \varepsilon_{r2}, \varepsilon_{r3}$ をそれぞれ 1, 2, 3, セルサイズを $a/40$, タイムステップ数を 70000 とし, 給電はガウスパルスを用いた. 分散特性の FDTD 法による解析結果を厳密解[6]とともに図 4 に示す. 図 4 の横軸は規格化波数 β/k_0 , 縦軸は規格化周波数 fa/c である. Γ, X, M は, 図 4 中に示したブリュリアンゾーンにおいて Γ を基点とした波数ベクトルの方向を表

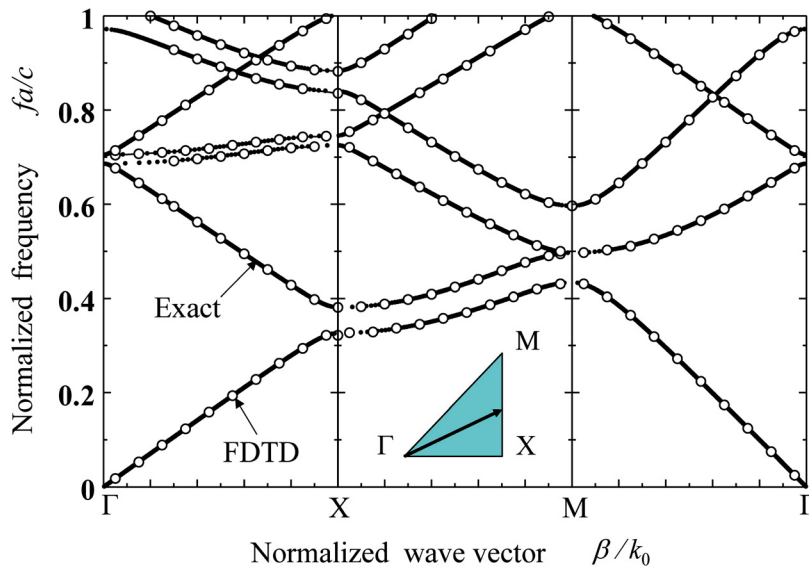


図 4 方形誘電体結晶の分散特性

($\varepsilon_{r1} = 1, \varepsilon_{r2} = 2, \varepsilon_{r3} = 3$, 丸印: FDTD 法, 実線: 厳密解)

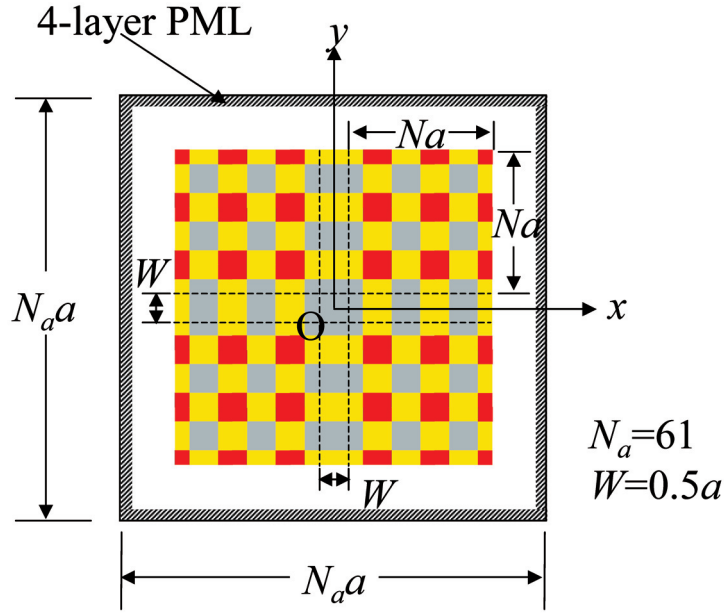


図5 方形誘電体結晶共振器のFDTD解析モデル ($N=2$, $W=0.5a$ の場合)

している．厳密解とFDTD法による結果は良く一致しており，PBCを用いたFDTD解析結果の妥当性が確認された．また， ΓX , XM , $M\Gamma$ のそれぞれにバンドギャップは存在するが，すべての方向について同時にバンドギャップが存在する周波数はなく，完全バンドギャップは存在しないことを確認した．

3. 共振器のFDTD解析

方形誘電体結晶を用いた共振器のFDTD解析を行う．図1に示す3種類の誘電体からなる方形誘電体結晶の基本格子が x , y 方向にそれぞれ周期数 $2N$ ，つまり長さ $2Na$ だけ並んでいる構造において， x , y 方向それぞれに対して中心部分の周期構造を幅 W だけ広げることによって，交差状の格子欠陥を与えて共振器を構成する． $N=2$, $W=0.5a$ のときの解析モデルを図5に示す．セルサイズを $a/8$ ，共振器の周りには真空とし，吸収境界条件として4層のPML (Perfectly Matched Layer) を用いた．給電点および観測点はともに共振器の中心 O とし，タイムステップ数は10000とし，給電はガウスパルスを用いた．給電パルスの帯域は用途に応じて変化させる必要がある．共振器の共振周波数を広帯域にわたり探索するため，規格化周波数が $fa/c=1$ までを含む広帯域パルスを使用した．

周期数 $N=10$ のときの規格化共振周波数を求めた結果， $fa/c=0.547$ が得られた．完全周期構造における厳密解では $fa/c=0.552$ であり[6]，周期数をさらに増加させることにより漸近するものと考えられる． $fa/c=0.547$ における中心軸上の電界 E_z 分布を， $fa/c=0.552$

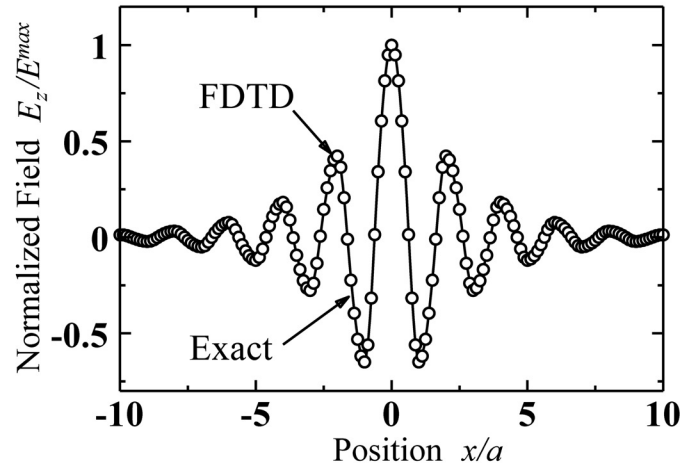


図6 方形誘電体結晶共振器の中心軸上の電界 E_z 分布
(丸印：FDTD 法, $fa/c = 0.547$, 実線：厳密解, $fa/c = 0.552$)

における厳密解とともに図6に示す．共振周波数はわずかに異なるものの，ほぼ一致した波形が得られた．なお，FDTD法を用いて無限周期構造を解析するためにはいかなる位相速度の電磁波であっても吸収境界が吸収する必要があるが，励振が広帯域である場合には吸収できない帯域もあり，プラズマやメタマテリアル等のFDTD解析を含めて課題を残している．

共振器の性能を Q 値で評価する．ここで $1/Q$ は損失の大きさを表し，損失の小さな共振系では Q 値は大きくなる．一般に共振器の Q 値は

$$Q = 2\pi f \frac{\text{共振器に蓄えられるエネルギー}}{\text{1秒間に失われるエネルギー}} \quad (5)$$

で定義される．実際の共振器における Q 値は放射損，導体損，誘電体損，または外部との結合による損失によるそれぞれの Q 値の逆数の和で求められるが，本稿では共振器の構造に対する性能を評価することを目的とし，放射損のみ考慮する．

共振器の Q 値を求める計算手法として，入力インピーダンスの周波数特性を用いて Q 値を求める方法がある．この場合，共振器の Q 値は

$$Q = \frac{\omega_c}{2\Delta\omega} \quad (6)$$

で与えられる．ここで， ω_c , $2\Delta\omega$ はそれぞれ中心周波数， $|Z_{in}| \geq |Z_{in}|_{\max} / \sqrt{2}$ となる帯域幅である．この方法は，入力インピーダンスが正確に求められる場合に有効である．FDTD法は時間領域における解析手法であり，フーリエ変換を用いて周波数特性を得るためには電磁界の時間応答が十分収束するまで計算する必要があるが， Q 値の大きい共振器を解析す

る場合は収束しにくいいため、莫大な計算量を必要としてしまう．そこで、本稿では蓄積エネルギーの減衰から Q 値を求める方法を用いる．この方法は時間領域で Q 値を求められる方法であり、 Q 値は

$$Q = \frac{\omega_c}{2\alpha} \quad (7)$$

で求められる．ここで、 α は時間に対する電磁界の減衰定数である．この方法では収束していない電磁界の時間応答を用いて Q 値を算出可能であるが、 Q 値が大きくなるにつれて減衰が小さくなるため、正確な α の算出のためには長い計算時間が必要となる．給電に広帯域パルスを用いて共振器の Q 値を求める場合、応答波形は多数の共振モードを含んだ変調波となり Q 値の算出が困難となる．そのため、共振器の共振周波数を中心周波数としたバーストパルスを使用した．

$W = 0.5a$ において周期数 N を変化させたときの Q 値を共振器に閉じ込められた電力とともに図 7 に示す．閉じ込められた電力は各周期数について共振器の中心軸上の電界分布を求め算出した．周期数の増加とともに Q 値が指数関数的に増加した．また、周期数 N に対する Q 値の傾きは閉じ込められた電力の傾きとほぼ等しい．この結果から、 Q 値は周期数 N を増加するにつれて指数関数的に無限大まで増加していくものと考えられる．

周期数 $N = 10, 15$ の場合について方形誘電体結晶共振器の電界 $|E_z|$ 分布を求めた結果を図 8 に示す．図中には共振器のサイズを白線で示した． $N = 10, 15$ のいずれの場合についても共振器の内部に電界が閉じ込められている様子がわかる． $N = 10$ の場合、共振器の外側に電界がわずかに漏れている様子が確認できるが、 $N = 15$ の場合は電界の閉じ込めが強くなり外側への漏れが低下している様子がわかる．

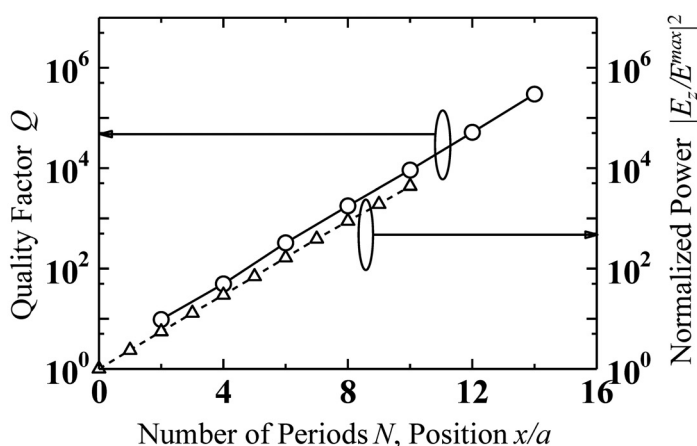


図 7 周期数 N に対する方形誘電体結晶共振器の Q 値 ($W = 0.5a, fa/c = 0.547$)

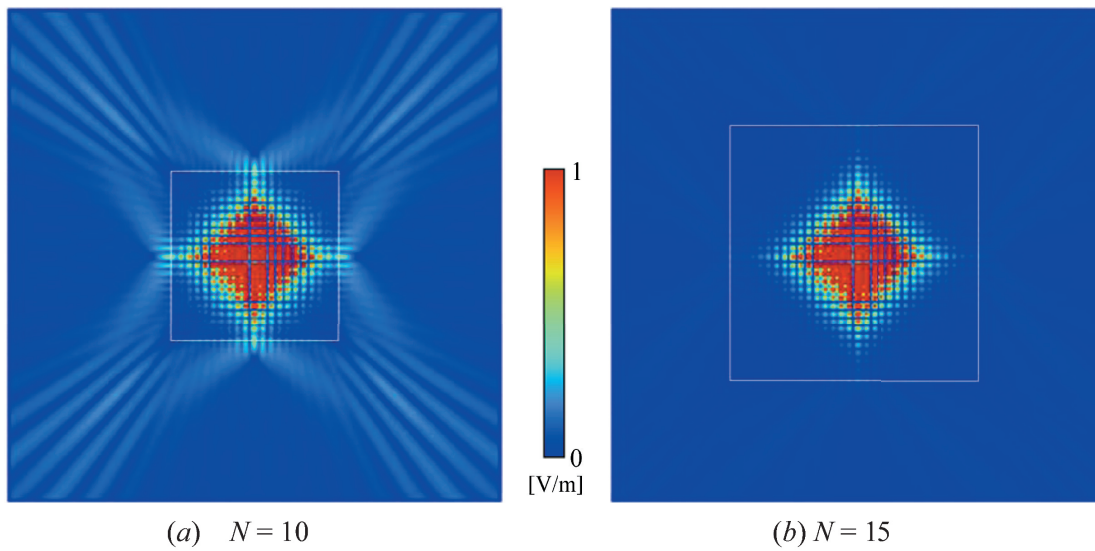


図8 方形誘電体結晶共振器の電界 $|E_z|$ 分布 ($W = 0.5a$, $fa/c = 0.547$)

4. ダイヤモンド型誘電体結晶のFDTD解析

方形誘電体結晶は $\epsilon_{r1} = 1$, $\epsilon_{r2} = 2$, $\epsilon_{r3} = 3$ の3種類の誘電率が必要であるため、方形誘電体結晶の誘電率分布を2種類の誘電率で近似的に構成可能なダイヤモンド型誘電体結晶について検討した。考案したダイヤモンド型誘電体結晶共振器を図9に示す。ダイヤモンド型誘電体結晶は比誘電率が $\epsilon_{r1} = 1$, $\epsilon_{r3} = 3$ の2種類の誘電体で構成し、方形誘電体結晶の ϵ_{r2} が $\epsilon_{r2} = (\epsilon_{r1} + \epsilon_{r3}) / 2$ で与えられるような誘電率分布を持たせたものであり、このような構造は厳密解を得ることは容易ではない。

$\epsilon_{r1} = 1$, $\epsilon_{r2} = 2$, $\epsilon_{r3} = 3$ の方形誘電体結晶とダイヤモンド型誘電体結晶について完全周期構造の分散特性、および共振器構造とした場合の共振周波数における中心軸上の電界 E_z

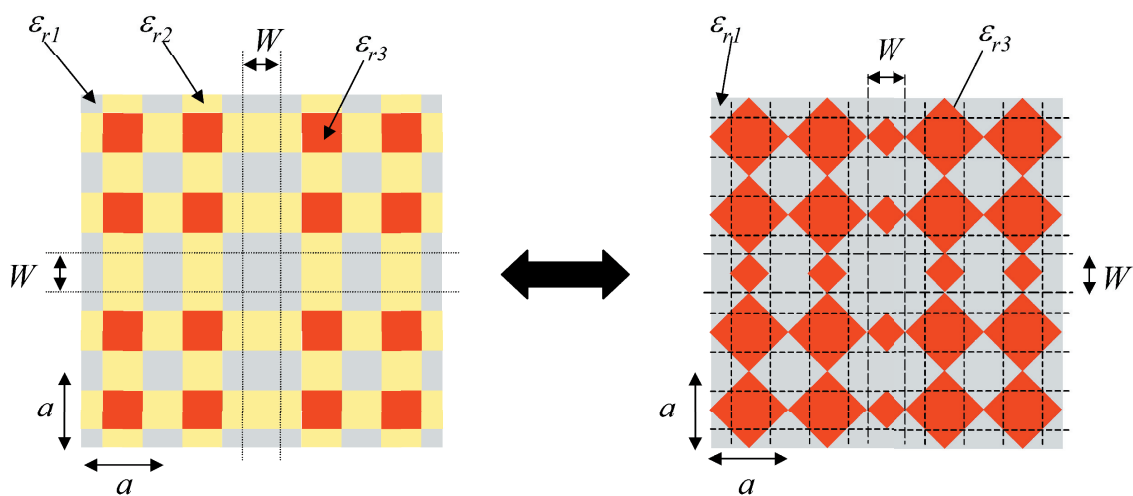


図9 方形誘電体結晶共振器の誘電率分布のダイヤモンド型誘電体結晶による近似

分布をそれぞれ図 10, 11 に示す．完全周期構造の解析ではセルサイズを $a/40$ ，タイムステップ数は 70000 とし，周期境界条件を用いた．一方，共振器構造の解析では $W=0.5a$ ， $N=10$ ，セルサイズを $a/8$ ，タイムステップ数を 20000 とした．共振器構造の解析において，方形誘電体共振器の場合は $(fa/c, Q) = (0.547, 9290)$ ，ダイヤモンド型誘電体共振器の場合は $(fa/c, Q) = (0.558, 21480)$ が得られた．これらの結果から，各結晶の分散特性はほぼ等しく，共振周波数もほぼ等しいが，エネルギーの閉じ込め効果はダイヤモンド型が強いことがわかる．ダイヤモンド型の閉じ込め効果が比較的強い理由としては， $\epsilon_{r2}=2$ がいないために欠陥の境界における誘電率の変化が急峻であることや，ダイヤモンド構造の突起によるエネルギーの集中などが考えられる．

$\epsilon_{r1}=1$ ， $W=0.5a$ ， $N=10$ のダイヤモンド型誘電体共振器において，比誘電率 ϵ_{r3} を変化させたときの共振周波数および Q 値を求めた結果を図 12 に示す．誘電率が高くなるにつれて共振周波数が低くなり，ある値に収束していく様相が観測されている．また， Q 値は誘電率の増加とともに高くなっていることがわかる．なお， ϵ_{r3} が 6 以上の場合の Q 値は求めている．これはタイムステップ数 20000 の計算時間では電界の減衰が小さいために減衰定数を算出できないためであり，さらに計算時間を長くする必要があることを意味するとともに，非常に高い Q 値を有する共振器の FDTD 解析が困難であることも意味している．

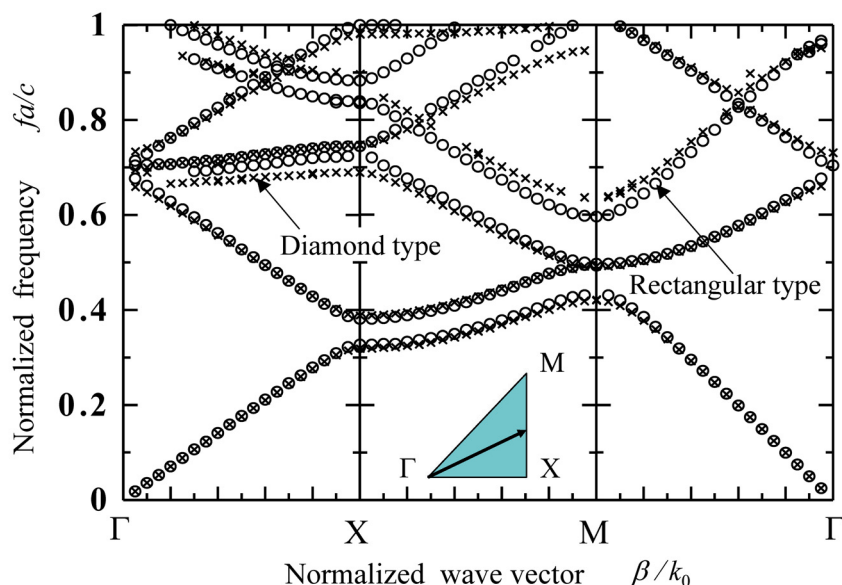


図 10 方形誘電体結晶とダイヤモンド型誘電体結晶の分散特性の比較

(方形型 : $\epsilon_{r1}=1$, $\epsilon_{r2}=2$, $\epsilon_{r3}=3$, ダイヤモンド型 : $\epsilon_{r1}=1$, $\epsilon_{r3}=3$)

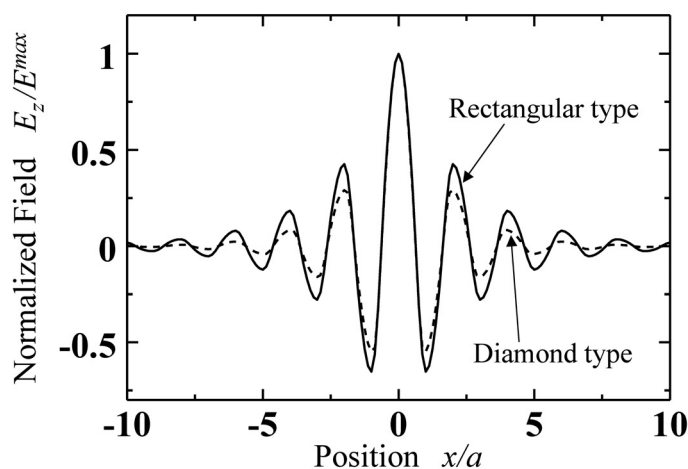


図 11 方形誘電体結晶共振器とダイヤモンド型誘電体結晶共振器の中心軸上の電界 E_z 分布（方形型： $fa/c = 0.547$ ，ダイヤモンド型： $fa/c = 0.558$ ）

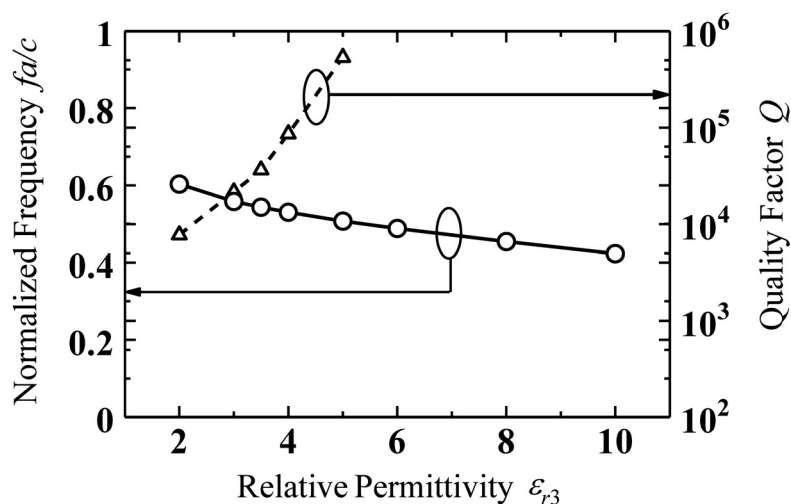


図 12 比誘電率 ϵ_{r3} を変化させたときのダイヤモンド型誘電体結晶共振器の規格化共振周波数および Q 値（ $\epsilon_{r1} = 1$, $W = 0.5a$, $N = 10$ ）

5. むすび

2次元フォトニック結晶の完全周期構造と有限周期の共振器についてFDTD解析を行った。分散特性と電界分布は厳密解と良く一致しており、FDTD法解析の妥当性が確認された。また、完全バンドギャップを持たない方形誘電体共振器の誘電率分布をダイヤモンド型の誘電体共振器で近似し、分散特性、電界分布、 Q 値を評価した。その結果、方形誘電体共振器の約2倍の Q 値が得られることを示した。

なお、ダイヤモンド型共振器のように複雑な構造を有するフォトニック結晶の解析にはFDTD解析が有用であり、高い Q 値の共振器を解析するためには大規模なメモリと高速演

算処理技術を備えたスーパーコンピュータの利用が不可欠であることを付してむすびとする。

謝辞

本研究の一部は東北大学サイバーサイエンスセンターのスーパーコンピュータを利用し、同センターとの共同研究で行われたものである。また、研究にあたっては同センターの有益なご指導と多大な協力をいただいた。

参考文献

- [1] 宇野亨, FDTD 法による電磁界およびアンテナ解析, コロナ社, 1998.
- [2] E.Yablonovitch, "Photonic band-gap structure," *J. Opt. Soc. Am. B*, vol. 10, pp.283-295, 1993.
- [3] F. Gadot et al., "Photonic Band Gap Materials for Devices in the Microwave Domain," *IEEE Trans. Magn.* Vol. 34, pp. 3028-3031, Sept, 1998.
- [4] T. Ochiai, J. Sanchez-Dehesa, "Localized defect modes in finite metallic two-dimensional photonic crystals," The American Physical Society, physical review b, vol. 65, 245111, 2002.
- [5] M. Okano et al., "Analysis and design of single-defect cavities in a three-dimensional photonic crystal," The American Physical Society, physical review b, vol. 66, 165211, 2002.
- [6] S. Kawakami, "Analytically solvable model of photonic crystal structures and novel phenomena," *J. Lightwave Technol.*, vol. 20, pp. 1644 -1650, 2002.
- [7] 渡辺貴之, 佐藤弘康, 澤谷邦男, 川上彰二郎, "2 種類の誘電体によるフォトニック結晶共振器の数値解析," 電子情報通信学会 2003 年総合大会, C-2-76, March 2003.
- [8] 渡辺貴之, 佐藤弘康, 澤谷邦男, 川上彰二郎, "フォトニック結晶の2次元FDTD 解析", 平成 14 年度電子情報通信学会東北支部連合大会, 1B17,p55, Aug, 2002.
- [9] 佐藤弘康, 渡辺貴之, 澤谷邦男, 川上彰二郎, "フォトニック結晶に用いる PML 吸収境界条件の検討", 平成 14 年度電子情報通信学会東北支部連合大会, 1B16, p54, Aug, 2002.